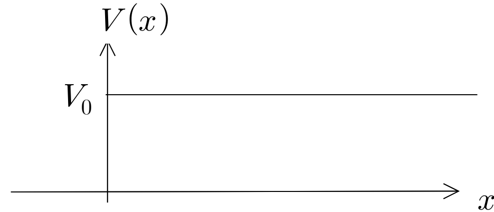
5.2 계단 위치에너지 (Step Potential)

이제 가장 간단한 계단 형태의 위치에너지의 경우에 대해서 생각해 보기로 하겠다.
이 경우 위치에너지는 다음과 같이 표현할 수 있다[그림 5.4].

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ V_0, & x > 0 \end{cases}$$



[그림 5.4] 계단 위치에너지

이 경우 슈뢰딩거 방정식은 $x < 0$ 인 경우에는

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

로 주어지고, $x > 0$ 인 경우에는

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi$$

로 주어진다.

이제 에너지 E 가 V_0 보다 큰 경우와 작은 경우의 두 가지 경우를 생각할 수 있는데, 각각의 경우에 슈뢰딩거 방정식의 해를 구하여 보도록 하자.

먼저 $E > V_0$ 인 경우의 해를 생각하여 보자. 이 경우 $x < 0$ 인 영역에서는 슈뢰딩거 방정식을 다음과 같이 고쳐 쓸 수 있으므로,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k_1^2\psi = 0 \ , \quad k_1^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} > 0$$

우리는 그 해를 $\psi \sim e^{\pm ik_1x}$ 로 쓸 수 있다.

$x > 0$ 인 경우는 슈뢰딩거 방정식을 다음과 같이 쓸 수 있으므로

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k_2^2\psi = 0 \ , \quad k_2^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0) > 0$$

그 해는 $\psi \sim e^{\pm ik_2x}$ 로 쓸 수 있다.

이제 입자가 왼쪽($-x$ 방향)에서 오른쪽으로 입사하였다고 하자. 한편, 오른쪽으로 진행하는 평면파는 $e^{i(kx-wt)}$ 의 형태를 갖고, 왼쪽으로 진행하는 평면파는 $e^{-i(kx+wt)}$ 의 형태를 가진다. 그런데 공통인자 e^{-iwt} 는 현재 우리가 고려하는 시간에 무관한 슈뢰딩거 방정식에 전혀 영향을 주지 않으므로 생략하면, 우리는 오른쪽으로 입사하는 입사파(incident wave)는 e^{ikx} 로, $x=0$ 에서 반사되어 다시 왼쪽으로 되돌아 가는 반사파는 e^{-ikx} 로 쓸 수 있다. 그러므로 만약 입자가 처음에 왼쪽($-x$ 방향)에서 오른쪽($+x$ 방향)으로 입사하였다면, $x < 0$ 인 영역에서의 일반적인 해는 입사파와 반사파를 합하여 다음과 같이 쓸 수 있다.

$$\psi_I = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

$x > 0$ 인 영역에서는 투과한 파동만 존재할 것이므로, 우리는 그 일반해를 다음과 같이 쓸 수 있다. $\psi_{II} = Ce^{ik_2x}$

한편 $x=0$ 에서는 ψ_I 과 ψ_{II} 가 일치하고, 그 기울기도 같아야 한다.
그러므로 파동함수는 다음의 경계조건을 만족하여야 한다.

$$\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0),$$

$$\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0} \quad .$$

즉, $A+B=C$, $ik_1A - ik_1B = ik_2C$ 를 만족하여야 하므로,

$B = \dfrac{k_1-k_2}{k_1+k_2}A$, $C = \dfrac{2k_1}{k_1+k_2}A$ 의 관계를 만족하여야 한다.

한편, 확률흐름 밀도는 앞 절에서

$J_x = \dfrac{i\hbar}{2m}\left(\dfrac{d\psi^*}{dx}\psi - \psi^*\dfrac{d\psi}{dx}\right)$ 으로 주어졌으므로,

입사파의 경우 $\psi_{입사} = Ae^{ik_1x}$ 를 대입하면

$$J_{입사} = \frac{i\hbar}{2m}(-ik_1A^*A - A^*ik_1A) = \frac{\hbar k_1}{m}|A|^2 \quad ,$$

반사파의 경우 $\psi_{반사} = Be^{-ik_1x}$ 를 대입하면

$J_{반사} = \dfrac{i\hbar}{2m}(ik_1B^*B + B^*ik_1B) = \dfrac{\hbar k_1}{m}|B|^2$ 를

그리고 투과파의 경우 $\psi_{II} = Ce^{ik_2x}$ 를 대입하면,

$J_{투과} = \dfrac{\hbar k_2}{m}|C|^2$ 를 얻는다.

그러므로 우리는 투과계수로

$$T = \left|\frac{J_{투과}}{J_{입사}}\right| = \left|\frac{k_2}{k_1}\frac{C^2}{A^2}\right| = \left|\frac{k_2}{k_1}\frac{4k_1^2}{(k_1+k_2)^2}\right| = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} \quad ,$$

반사계수로 $R = \left|\dfrac{J_{반사}}{J_{입사}}\right| = \left|\dfrac{B}{A}\right|^2 = \dfrac{(k_1-k_2)^2}{(k_1+k_2)^2}$ 을 얻는다.

위치에너지가 0 일 경우($V_0=0$), $k_1 = k_2$ 이므로, 반사계수가 0 이 되고, 투과계수가 1 이 된다. 이는 위치에너지의 턱이 없을 경우 반사파가 없을 것이라는 예상과 일치하는 결과를 보여준다. 그리고 일반적인 경우에 $T+R=1$ 이 만족됨을 보여준다.

다음으로 우리는 에너지 E 가 V_0 보다 작고 0 보다는 큰 경우를 생각해 보도록 하겠다. 그러면 $x<0$ 인 영역에서는 앞의 경우와 같이 슈뢰딩거 방정식이 같은 형태를 갖는다.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad , \quad k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} > 0 \quad ,$$

그리고 파동함수의 해는 $\psi \sim e^{\pm ikx}$ 로 쓸 수 있다.

$x>0$ 인 경우는 슈뢰딩거 방정식이 다음과 같이 달라진다.

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \kappa^2\psi = 0 \quad , \quad \kappa^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) > 0$$

이때 파동함수의 해는 $\psi \sim e^{\pm\kappa x}$ 로 쓸 수 있다.
이제 앞의 경우에서와 같이 입자가 왼쪽($-x$ 방향)에서 오른쪽($+x$ 방향)으로 입사하였다면, $x < 0$ 인 영역에서의 일반적인 해는 입사파와 반사파가 공존하므로

$$\psi_I = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad ,$$

$x > 0$ 인 영역에서는 투과한 파동만 존재하므로

$$\psi_{II} = C e^{-\kappa x}$$

로 쓸 수 있다. 여기서 파동함수는 $e^{+\kappa x}$ 형태를 취할 수 없는데 이러한 파동함수는 $x = +\infty$ 에서 그 값이 무한대가 되어, 이 경우 입자의 존재확률이 무한대가 되므로, 존재확률의 합이 1 이 되어야 함에 어긋나기 때문이다. 이제 앞의 경우처럼 두 영역의 경계점인 $x = 0$ 에서 동일한 경계조건이 만족되어야 한다.

$$\psi_I(x=0) = \psi_{II}(x=0),$$

$$\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0} \quad .$$

그러므로 계수들은 다음의 조건들을 만족하여야 한다.

$$A + B = C$$

$$ikA - ikB = -\kappa C$$

이를 연립하며 풀면 $(ik+\kappa)A = (ik-\kappa)B$ 이 되므로

$B = \frac{ik+\kappa}{ik-\kappa}A$, $C = \frac{2ik}{ik-\kappa}A$ 를 얻는다.

다시 앞의 경우에서와 같이 입사파와 반사파의 확률흐름 밀도를 구하면,

$$J_{\text{입사}} = \frac{i\hbar}{2m}(-ikA^*A - A^*ikA) = \frac{\hbar k}{m}|A|^2, \quad J_{\text{반사}} = \frac{\hbar k}{m}|B|^2 \quad ,$$

한편, 투과파의 확률흐름 밀도는 $\psi = C e^{-\kappa x}$ 를

$$J_x = \frac{i\hbar}{2m}\left(\frac{d\psi^*}{dx}\psi - \psi^*\frac{d\psi}{dx}\right)$$

에 대입하면

$$J_{\text{투과}} = \frac{i\hbar}{2m}\left(-\kappa C^* C e^{-2\kappa x} + \kappa C^* C e^{-2\kappa x}\right) = 0$$

이 된다. 즉, 투과된 확률흐름 밀도는 없음을 알 수 있다. 우리는 여기서 실함수인 파동함수의 확률흐름 밀도는 정의식에 의하여 항상 0 이 됨을 주목하여야 할 것이다.

투과된 확률흐름 밀도가 없으므로 투과계수는 0 이 된다. 한편, 반사계수는

$$R = \left|\frac{J_{\text{반사}}}{J_{\text{입사}}}\right| = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left|\frac{ik+\kappa}{ik-\kappa}\right|^2 = 1$$

이 되어

여전히 $T + R = 1$ 이 만족됨을 알 수 있다.
